

# 基于双线性型的非负矩阵集分解

李乐 章毓晋

(清华大学信息科学与技术国家实验室 北京 100084)

(清华大学电子工程系 北京 100084)

**摘要** 非负矩阵分解(Non-negative Matrix Factorization, NMF)是一种常用的非负多元数据描述方法. 处理数据矩阵集时, NMF 描述力不强、推广性差. 为解决这两个问题, 并保留 NMF 的好特性, 该文提出了非负矩阵集分解(Non-negative Matrix Set Factorization, NMSF)的概念, 并在 NMSF 的框架下系统研究了基于双线性型的非负矩阵集分解(Bilinear Form-Based Non-negative Matrix Set Factorization, BFBNMSF), 构造了单调下降的 BFBNMSF 算法. 理论分析和实验结果均表明: 处理数据矩阵集时, BFBNMSF 比 NMF 描述力强、推广性好. 由此可认为, 此时 BFBNMSF 比 NMF 更善于抓住数据的本质特征.

**关键词** 非负矩阵集分解; 双线性型; 非负矩阵分解; 多元数据描述; 图像描述; 特征提取

**中图法分类号** TP391 **DOI号**: 10.3724/SP.J.1016.2009.01536

## Bilinear Form-Based Non-Negative Matrix Set Factorization

LI Le ZHANG Yu-Jin

(Tsinghua National Laboratory for Information Science and Technology, Tsinghua University, Beijing 100084)

(Department of Electronic Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084)

**Abstract** Non-negative Matrix Factorization (NMF) is a popular technique for representations of non-negative multivariate data. While treating a set of matrices, NMF is confronted with two main problems (unsatisfactory accuracy of representation and bad generality). In this paper, Non-negative Matrix Set Factorization (NMSF) is conceived to overcome the two problems and to retain NMF's good properties. Under the frame of NMSF, Bilinear Form-Based Non-negative Matrix Set Factorization (BFBNMSF) is systematically studied, and a monotonic algorithm of BFBNMSF is put forward. Theoretical analysis and experimental results show that while processing a data matrix-set, BFBNMSF results in more accurate representation and holds better generality than NMF, therefore it tends to extract more essential features of data matrix sets than NMF.

**Keywords** Non-negative Matrix Set Factorization (NMSF); bilinear form; Nonnegative Matrix Factorization (NMF); multivariate data representation; image representation; feature extraction

## 1 引言

在信号处理、神经网络、模式识别、计算机视觉

以及图像工程的研究中, 如何构造一个能使多维观测数据被更好地描述出来的变换方法始终是一个非常重要的问题. 通常, 一个好的变换方法应具备两个基本特性: (1) 可以使数据的某种潜在结构变得清

晰;(2)能使数据的维数得到一定程度的约减。

主分量分析、投影寻踪、因子分析、冗余归约和独立分量分析是一些最常用的数据变换方法. 这些方法都可理解为在一定的限制下对数据进行变换或分解, 不同的方法间因施加于其上的限制条件不同而有本质区别, 但它们却有两个共同的特点:(1)允许负的分解量存在(即允许减性的描述方式);(2)实现线性的维数约减. 不同于它们, 一种新的方法——非负矩阵分解(Non-negative Matrix Factorization, NMF)由 Lee 和 Seung 提出<sup>[1]</sup>, 它使分解后的所有分量均为非负值(即要求进行纯加性的描述), 并且同时实现非线性的维数约减。

NMF 的心理学和生理学构造依据是对整体的感知基于对组成整体的部分的感知构成(感知的过程是纯加性的过程)<sup>[2-4]</sup>, 这也符合直观的理解: 整体由部分组成<sup>[1]</sup>. 因此, 它在某种意义上抓住了生物或智能数据描述的本质. 此外, 纯加性(或非负性)限制的引入导致了 NMF 分解结果在一定程度上的稀疏性<sup>[1]</sup>, 稀疏的描述是处于完全分布式的描述和单一活跃分量的描述间的一种有效数据描述形式<sup>[5]</sup>. 有关 NMF 的研究进展可以参见新近的一篇综述文章<sup>[6]</sup>.

作为一种有效的特征提取方法, 近年来 NMF 在计算机视觉、信号处理、模式识别和图像工程等研究领域均获得了大量的应用, 其原因可归结为:(1)NMF 稀疏的描述使对数据的解释变得方便(仅有少量分量活跃使数据的组成方式变得清晰直观)<sup>[1,7]</sup>; (2)NMF 纯加性的描述使对数据的分析显得合理(许多物理信号中不可能存在负的组成成分)<sup>[1,7]</sup>; (3)NMF 相对稀疏的特征能在一定程度上抑制由外界变化(如拍摄图像时可能遇到的物体被部分遮挡、光照条件变化和物体旋转等)给特征提取带来的不利影响<sup>[8]</sup>.

在很多应用中, 数据样本常以矩阵的形式呈现(如灰度图像). 因为 NMF 的处理对象本质上是向量集, 所以一般的做法是先将这些数据矩阵先向量化, 然后再放到 NMF 模型中去处理<sup>[1,7-8]</sup>. 这样做的结果是用于学习的样本量可能远远小于被学习参数的维数(典型的小样本学习问题), 这会导致:(1)NMF 对数据的描述能力不强(描述的准确度不够); (2)NMF 结果的推广性差(图 1 和图 2 直观地诠释了上述问题, 本文第 2 节会对此做详细说明)。

为解决上述问题, 并保留 NMF 的好特性, 本文提出了非负矩阵集分解(Non-negative Matrix Set

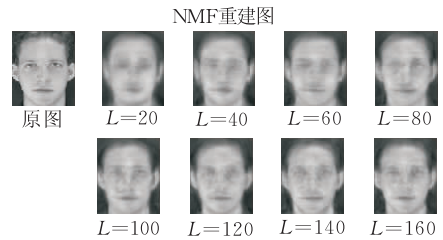


图 1 NMF 的描述力(以训练用人脸图像的重建质量说明, 训练数据为 ORL 库的全部 400 幅图)



图 2 NMF 的推广性(以非训练用人脸图像的重建质量说明)

Factorization, NMSF)的概念. 不同于 NMF 处理矩阵的向量化结果, NMSF 直接处理数据矩阵集中的矩阵. 在 NMSF 的框架下, 本文系统研究了基于双线性型的非负矩阵集分解(Bilinear Form-Based Non-negative Matrix Set Factorization, BFBNMSF), 构造了一个单调下降的 BFBNMSF 算法. 从整体上看, BFBNMSF 把训练用全部数据矩阵看成一个集合做整体处理, 提取出全部矩阵所共有的描述矩阵; 从局部上看, BFBNMSF 对矩阵集中的每一个矩阵都进行了一次新形式的(3 因子)NMF. BFBNMSF 对数据矩阵集的描述力强, 由它得出结果的推广性也好。

本文第 2 节介绍 NMF 及其存在的问题; 第 3 节提出并分析 NMSF 和 BFBNMSF, 构造 BFBNMSF 算法(严格的数学推导见附录); 第 4 节对 BFBNMSF 的性质(描述力强、推广性好)做实验验证; 第 5 节总结全文。

## 2 NMF 及其存在的问题

对一个  $M$  维的随机向量  $\mathbf{v}$  进行了  $N$  次的观测, 记这些观测为向量集  $\{\mathbf{v}_j, j=1, 2, \dots, N\}$ , 取  $\mathbf{V} = [\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N]$ , 其中  $\mathbf{V}_j = \mathbf{v}_j, j=1, 2, \dots, N$ .

**定义 1.** NMF 是求取非负的  $M \times L$  维基矩阵

$\mathbf{W}$  和非负的  $L \times N$  维系数矩阵  $\mathbf{H}$  使<sup>[1]</sup>

$$\mathbf{V} \approx \mathbf{W}\mathbf{H} \quad (1)$$

的方法。

由于通常设定  $L \ll \min(M, N)$ , 所以只有在  $\mathbf{W}$  包含了随机变量  $\mathbf{v}$  的本质特征时, 才可使  $\mathbf{V} \approx \mathbf{W}\mathbf{H}$  (即用很少量的特征可描述大量的数据)<sup>[9]</sup>。

NMF 的实质是在加性描述的限制下, 在尽可能保持信息完整的情况下, 将高维的随机模式 ( $\{\mathbf{v}_j, j=1, 2, \dots, N\}$ ) 简化为低维的随机模式 ( $\{\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2, \dots, \mathbf{H}_N\}$ ), 这种简化的基础是估计出数据中的本质结构  $\mathbf{W}$ . 从代数的观点看,  $\mathbf{V}_{\cdot j} \approx \sum_{i=1}^M \mathbf{W}_{\cdot i} \mathbf{H}_{ij}$ ,  $\mathbf{W}$  的列是基,  $\mathbf{H}$  要依  $\mathbf{W}$  的存在而存在. 从机器学习的角度看,  $\mathbf{W}$  包含了随机向量  $\mathbf{v}$  的某些本质特性, 它除了要用于描述训练数据外还要用于描述非训练数据, 且  $\mathbf{W}$  定了后依据一定的  $\mathbf{V}$  和  $\mathbf{W}\mathbf{H}$  间差异度量准则  $\mathbf{H}$  也就定了, 所以  $\mathbf{W}$  蕴涵了 NMF 学习结果的全部内容, 它是学习过程中被学习的唯一参数. 此外, 无论依据哪种  $\mathbf{V}$  和  $\mathbf{W}\mathbf{H}$  间差异度量准则,  $\mathbf{H}$  均为  $\mathbf{V}$  在  $\mathbf{W}$  上的非线性投影结果 (或者说, 对于随机向量  $\mathbf{v}$  的任意一次实现  $\mathbf{v}_i$  有  $\mathbf{v}_i \approx \mathbf{W}\mathbf{h}_i$ ,  $\mathbf{h}_i$  为  $\mathbf{v}_i$  对  $\mathbf{W}$  做非线性投影的结果,  $\mathbf{v}_i$  可为训练数据, 也可为非训练数据), 所以 NMF 体现了一种非线性的数据维数约减思路。

从计算的角度讲, NMF 可归结为对如下的优化问题求解:

$$\min_{0 \leq \mathbf{W}, \mathbf{H}} f_v(\mathbf{W}, \mathbf{H}) \quad (2)$$

其中  $f_v(\mathbf{W}, \mathbf{H})$  刻画了  $\mathbf{V}$  和  $\mathbf{W}\mathbf{H}$  间的差异性,  $f_v$  可以是任意的距离度量或散度. 已有的研究结果显示, 可利用的任何形式的  $f_v$  均不是  $(\mathbf{W}, \mathbf{H})$  的凸函数, 所以对于计算机视觉、模式识别以及图像工程等研究领域中所处理的大规模问题求解 NMF 的全局最优解并不现实<sup>[8]</sup>, 可行的办法是通过交替地优化  $\mathbf{W}$  和  $\mathbf{H}$  得到相应 NMF 问题的一个局部解<sup>[1, 8-9]</sup>. 这里应强调, 交替优化过程中, 求  $\mathbf{H}$  只是为了辅助求  $\mathbf{W}$ , 求  $\mathbf{W}$  是进行 NMF 学习的根本目的。

如果观测数据不是向量集  $\{\mathbf{v}_j, j=1, 2, \dots, N\}$ , 而是  $m \times n$  维的矩阵集  $\{\mathbf{A}^k, k=1, 2, \dots, N\}$ , 通常的做法是将它们矢量化为  $\{\text{vec}(\mathbf{A}^k), k=1, 2, \dots, N\}$ , 再对  $[\text{vec}(\mathbf{A}^1), \text{vec}(\mathbf{A}^2), \dots, \text{vec}(\mathbf{A}^N)]$  做 NMF 得到相应的  $\mathbf{W}$  和  $\mathbf{H}$ <sup>[1, 7-8]</sup>, 这是因为 NMF 的处理对象本质上是向量集. 如前所述,  $\mathbf{W}$  是 NMF 学习过程的被学习参数; 学习  $\mathbf{W}$  的过程是一个用  $N$  个样本去学习  $mn \times L$  维参数的过程, 它常成为典型的小样本学

习过程, 此时被学习对象的维数和样本量间差距巨大, 两者比为  $mn \times L/N$ , 其往往达数百甚至数千. 根据大数定律, 小样本问题通常会导致参数估计不准确. 参数估计不准确就意味着参数对总体的刻画不准确, 训练样本一般被认为是总体的简单随机抽样, 那么, 参数估计不准确时, 模型对训练样本的描述能力不会很好. 训练样本的数量不够意味着, 相对其所在的总体而言, 训练样本显得稀疏. 参数是由训练样本得到的, 小样本情况下, 其兼顾总体中非训练样本性质的能力不会很强, 所以, 此时模型推广性一般很差. 综上所述, 处理数据矩阵集时, NMF 对数据矩阵集的描述能力通常不强, NMF 结果的推广性一般很差, 图 1 和图 2 直观地揭示了这两个问题. 图 1 显示了将 ORL 数据库<sup>①</sup>中 400 幅图像 (大小为  $112 \times 92$ ) 进行 NMF 后, 利用得到的分解结果重建人脸图像的一个示例 ( $L$  是保留基的个数), 显然: 重建图像的质量虽然随保留基的个数增多而逐渐变好, 但即使保留 160 个基 (此时压缩率仅为 2.41) 重建效果也不能令人满意, 这说明 NMF 对数据矩阵集的描述能力不强. 在图 2 中, 左边 3 幅从上到下分别取自 YALE 数据库<sup>②</sup>、PIE 数据库<sup>[10]</sup> 和 UMIST 数据库<sup>③</sup>, 右边 3 幅从上到下依次为用构造图 1 时得到的那 160 个 NMF 基对左边 3 幅图进行重建的结果, 这里的 3 幅重建图的质量远差于图 1 中用这 160 个 NMF 基得到的重建图 (图 1 中右下角那幅图) 的质量, 这说明 NMF 对训练图的描述能力远远好于对非训练图的描述能力, 即此时 NMF 的推广性很差. 需说明, 图 1 和图 2 是基于 Lee 和 Sueng 构造的 (最小二乘) 算法<sup>[8]</sup> 得到的 (文中后续实验结果也都基于这个算法得到, 它是事实上的 NMF 基准算法), 当用其他算法时也一定会得到类似的结果, 因为 NMF 处理数据矩阵集时遇到的问题源于 NMF 本身, 它不是依赖于具体算法而存在的。

### 3 NMSF 和 BFBNMSF

NMF 自被提出后受到了广泛地研究与应用, 这是因为它有诸多优点, 且在认知学上具有可解释性, NMF 的这些优势主要源于非负性限制的引

① ORL face database, at the AT&T (Olivetti) Research Laboratory, 1992. <http://www.cl.cam.ac.uk/Research/DTG/attarchive/facedatabase.html>.

② YALE face database, 1997. <http://cvc.yale.edu/projects/yalefaces/yalefaces.html>.

③ UMIST face database, 1997. <http://images.ee.umist.ac.uk/danny/database.html>.

入<sup>[1]</sup>。但是,如上节所述,NMF 处理数据集时,描述力不强,推广性差,为使矩阵集可被 NMF 处理而对矩阵集中的矩阵逐一矢量化是造成这两个问题的原因之一。取 NMF 之长(也对分解结果施加非负性限制),补 NMF 之短(避免矢量化操作,直接处理数据集集中的矩阵,文献[11]也用类似的思路解决了 PCA 存在的问题),本文提出了 NMSF 的概念。在 NMSF 的框架下,文中系统研究 BFBNMSF。

### 3.1 NMSF 的定义与分析

对一个  $m \times n$  维的随机矩阵  $\mathbf{A}$  进行了  $N$  次的观测,记这些观测为矩阵集  $\{\mathbf{A}^k, k=1, 2, \dots, N\}$ 。

**定义 2.** NMSF 是求取非负的  $m \times l_1$  维矩阵集  $\{\mathbf{B}_1^k, k=1, 2, \dots, N\}$ 、非负的  $l_1 \times l_2$  维矩阵集  $\{\mathbf{B}_2^k, k=1, 2, \dots, N\}$ 、 $\dots$ 、非负的  $l_{K-2} \times l_{K-1}$  维矩阵集  $\{\mathbf{B}_{K-1}^k, k=1, 2, \dots, N\}$  以及非负的  $l_{K-1} \times n$  维矩阵集  $\{\mathbf{B}_K^k, k=1, 2, \dots, N\}$  使

$$\mathbf{A}^k \approx \mathbf{B}_1^k \mathbf{B}_2^k \cdots \mathbf{B}_{K-1}^k \mathbf{B}_K^k, \quad k=1, 2, \dots, N \quad (3)$$

的方法。

这里定义的是一个一般性的操作框架, $K$  的取值要依具体模型而定,而且  $\exists c_1, c_2, \dots, c_{K-1} \in \{1, 2, \dots, K\}$  使  $\mathbf{B}_{c_q}^1 = \mathbf{B}_{c_q}^2 = \dots = \mathbf{B}_{c_q}^N = \mathbf{B}_{c_q}$  ( $q=1, 2, \dots, K-1, c_q, q=1, 2, \dots, K-1$ ) 的取值也要依具体模型而定。

通常  $l_1, l_2, \dots, l_{K-1} \ll \min(m, n)$ , 且  $K$  不很大,那么只有  $\mathbf{B}_{c_q}$  ( $q=1, 2, \dots, K-1$ ) 包含了随机矩阵  $\mathbf{A}$  的本质特征时,才可能使  $\mathbf{A}^k \approx \mathbf{B}_1^k \mathbf{B}_2^k \cdots \mathbf{B}_{K-1}^k \mathbf{B}_K^k, k=1, 2, \dots, N$  (即用很少量的特征可描述大量的数据)。

NMSF 和 NMF 间有本质的区别,它们是两类完全不同的方法,因为 NMF 的处理对象本质上是向量集  $\{\mathbf{v}_j, j=1, 2, \dots, N\}$ , 而 NMSF 的处理对象本质上是矩阵集  $\{\mathbf{A}^k, k=1, 2, \dots, N\}$ ; NMSF 和 NMF 的性质会有相近之处,因为它们都对分解结果施加了非负的限制。

此外, NMSF 继承了 NMF 将高维的随机模式 ( $\{\mathbf{A}^k, k=1, 2, \dots, N\}$ ) 简化为低维的随机模式 ( $\{\mathbf{B}_{c_K}^k, c_K = \{1, 2, \dots, K\} / \{c_1, c_2, \dots, c_{K-1}\}, k=1, 2, \dots, N\}$ ) 和非线性数据维数约减的特点。

从机器学习的角度看,  $\mathbf{B}_{c_q}$  ( $q=1, 2, \dots, K-1$ ) 包含了随机矩阵  $\mathbf{A}$  的某些本质特性,  $\mathbf{B}_{c_q}$  ( $q=1, 2, \dots, K-1$ ) (码本)除了要被用于描述训练数据外还要被用于描述非训练数据,且  $\mathbf{B}_{c_q}, q=1, 2, \dots, K-1$  定了后依据一定的  $\mathbf{A}^k$  和  $\mathbf{B}_1^k \mathbf{B}_2^k \cdots \mathbf{B}_{K-1}^k \mathbf{B}_K^k$  间差异度量准则  $\mathbf{B}_{c_K}^k, c_K = \{1, 2, \dots, K\} / \{c_1, c_2, \dots, c_{K-1}\}$  (编码)也就定了,所以  $\mathbf{B}_{c_q}$  ( $q=1, 2, \dots, K-1$ ) 蕴涵

了 NMSF 学习结果的全部内容,它们是学习过程中被学习的参数。

从计算的角度讲, NMSF 可归结为对如下的优化问题求解:

$$\min_{0 \leq \mathbf{B}_1^k, \mathbf{B}_2^k, \dots, \mathbf{B}_{K-1}^k, \mathbf{B}_K^k, k=1, 2, \dots, N} \sum_{k=1}^N f_{\mathbf{A}^k}(\mathbf{B}_1^k, \mathbf{B}_2^k, \dots, \mathbf{B}_{K-1}^k, \mathbf{B}_K^k) \quad (4)$$

$f_{\mathbf{A}^k}(\mathbf{B}_1^k, \mathbf{B}_2^k, \dots, \mathbf{B}_{K-1}^k, \mathbf{B}_K^k)$  刻画了  $\mathbf{A}^k$  与  $\mathbf{B}_1^k \mathbf{B}_2^k \cdots \mathbf{B}_{K-1}^k \mathbf{B}_K^k$  间的差异性,  $f_{\mathbf{A}^k}$  可以是任意的距离度量或散度。学习  $\mathbf{B}_{c_q}, q=1, 2, \dots, K-1$  的过程是用  $N$  个样本学习  $m \times l_1 + l_1 \times l_2 + \dots + l_{K-2} \times l_{K-1} + l_{K-1} \times n - \text{size}(\mathbf{B}_{c_K}^k)$  维参数的过程 ( $\text{size}(\mathbf{B}_{c_K}^k)$  指  $\mathbf{B}_{c_K}^k$  行维与列维的乘积), 只要  $K$  不很大,  $N$  不特别小,这就不再是小样本学习问题。并且,无论  $N$  为多少,只要  $K$  不非常大,此时样本量和被学习参数的维数之比一定远小于做 NMF 时的样本量和被学习参数的维数之比。所以,可推断在处理数据矩阵集时,只要 NMSF 方法设计合理(包括  $K$  和  $c_q$  ( $q=1, 2, \dots, K-1$ ) 取值的确定,数据表示模型和优化模型选择),它会比 NMF 描述准确、推广性好。

### 3.2 BFBNMSF 的定义与分析

NMSF 是解决 NMF 处理数据矩阵集时遇到问题的一个一般性操作框架。从应用 NMSF 的角度考虑,需在 NMSF 框架下定义具体的 NMSF 方法,并用算法实现它。本文研究 BFBNMSF,依 NMSF 的定义,此时取  $K=3, c_1=1, c_2=3, c_3=2, \mathbf{B}_1^k = \mathbf{L}, k=1, 2, \dots, N, \mathbf{B}_2^k = \mathbf{D}^k, k=1, 2, \dots, N$  和  $\mathbf{B}_3^k = \mathbf{R}, k=1, 2, \dots, N$ , 有如下的 BFBNMSF 定义。

**定义 3.** BFBNMSF 是求取非负的  $m \times l_1$  维描述矩阵  $\mathbf{L}$ 、非负的  $l_2 \times n$  维描述矩阵  $\mathbf{R}$  以及非负的  $l_1 \times l_2$  维双线性型矩阵集  $\{\mathbf{D}^k, k=1, 2, \dots, N\}$  使

$$\mathbf{A}^k \approx \mathbf{L} \mathbf{D}^k \mathbf{R}, \quad k=1, 2, \dots, N \quad (5)$$

的方法。

从整体上看, BFBNMSF 把所有训练用数据矩阵看成一个对象做处理,提取出全部矩阵所共用的描述因子  $\mathbf{L}$  和  $\mathbf{R}$ ; 从局部上看, BFBNMSF 对矩阵集中的每一个矩阵都进行一次新形式的 (3 因子) NMF ( $\mathbf{A}^k \approx \mathbf{L} \mathbf{D}^k \mathbf{R}$ )。

需要强调, BFBNMSF 是 NMSF 的一种实现形式,因此 BFBNMSF 具有 NMSF 的通性,它应比 NMF 描述力强、推广性好。  $\mathbf{L}$  和  $\mathbf{R}$  代表了整个矩阵集的公共特性,  $\{\mathbf{D}^k, k=1, 2, \dots, N\}$  依  $\mathbf{L}$  和  $\mathbf{R}$  而确定,  $\mathbf{L}$  和  $\mathbf{R}$  是 BFBNMSF 训练过程中被学习的参数,它们蕴涵了 BFBNMSF 学习结果的全部。

### 3.3 对 BFBNMSF 的代数学和认知学解释

设  $V_1$  和  $V_2$  是域  $R$  上的线性空间, 规定  $V_1$  是  $l_1$  维的, 它的基为  $\{\boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_2, \dots, \boldsymbol{\varepsilon}_{l_1}\}$ ,  $V_2$  是  $l_2$  维的, 它的基为  $\{\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \dots, \boldsymbol{\eta}_{l_2}\}$ , 定义  $V_1^+ = \{\boldsymbol{\alpha} \mid \boldsymbol{\alpha} = \alpha_1 \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \alpha_2 \boldsymbol{\varepsilon}_2 + \dots + \alpha_{l_1} \boldsymbol{\varepsilon}_{l_1}, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{l_1} \geq 0\}$ ,  $V_2^+ = \{\boldsymbol{\beta} \mid \boldsymbol{\beta} = \beta_1 \boldsymbol{\eta}_1 + \beta_2 \boldsymbol{\eta}_2 + \dots + \beta_{l_2} \boldsymbol{\eta}_{l_2}, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{l_2} \geq 0\}$ . 考虑  $L_{i1} \boldsymbol{\varepsilon}_1 + L_{i2} \boldsymbol{\varepsilon}_2 + \dots + L_{il_1} \boldsymbol{\varepsilon}_{l_1}$  ( $i = 1, 2, \dots, m$ ) 为  $V_1^+$  上的  $m$  个数据点,  $R_{1j} \boldsymbol{\eta}_1 + R_{2j} \boldsymbol{\eta}_2 + \dots + R_{l_2j} \boldsymbol{\eta}_{l_2}$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) 为  $V_2^+$  上的  $n$  个数据点. 定义  $V_1 \times V_2 \rightarrow R$  的双线性型<sup>[12]</sup> 集合的一个子集为  $G = \{g \mid g: V_1 \times V_2 \rightarrow R; \forall \boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2 \in V_1, \forall \boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2 \in V_2, \forall k_1, k_2 \in R, g(k_1 \boldsymbol{\alpha}_1 + k_2 \boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\beta}_1) = k_1 g(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\beta}_1) + k_2 g(\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\beta}_1), g(\boldsymbol{\alpha}_1, k_1 \boldsymbol{\beta}_1 + k_2 \boldsymbol{\beta}_2) = k_1 g(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\beta}_1) + k_2 g(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\beta}_2); \forall \boldsymbol{\alpha} \in V_1^+, \forall \boldsymbol{\beta} \in V_2^+, g(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \geq 0\}$ .  $\exists d^k \in G$ , 使  $\forall i \in \{1, 2, \dots, m\}, j \in \{1, 2, \dots, n\}$ , 有

$$\begin{aligned} A_{ij}^k &\approx d^k (L_{i1} \boldsymbol{\varepsilon}_1 + L_{i2} \boldsymbol{\varepsilon}_2 + \dots + L_{il_1} \boldsymbol{\varepsilon}_{l_1}, \\ &R_{1j} \boldsymbol{\eta}_1 + R_{2j} \boldsymbol{\eta}_2 + \dots + R_{l_2j} \boldsymbol{\eta}_{l_2}) \\ &= \sum_{a=1}^{l_1} \sum_{b=1}^{l_2} L_{ia} R_{bj} d^k (\boldsymbol{\varepsilon}_a, \boldsymbol{\eta}_b) = \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{D}^k \mathbf{R}_j \end{aligned} \quad (6)$$

即  $\mathbf{A}^k \approx \mathbf{L} \mathbf{D}^k \mathbf{R}$ , 其中  $D_{ab}^k = d^k(\boldsymbol{\varepsilon}_a, \boldsymbol{\eta}_b)$ ,  $\mathbf{L}_i = (L_{i1}, L_{i2}, \dots, L_{il_1})$ ,  $\mathbf{R}_j = (R_{1j}, R_{2j}, \dots, R_{l_2j})$ ,  $\mathbf{D}^k$  为  $d^k$  在  $\{\boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_2, \dots, \boldsymbol{\varepsilon}_{l_1}\}$  和  $\{\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \dots, \boldsymbol{\eta}_{l_2}\}$  下对应的矩阵表示, 它与  $d^k$  是一一对应的, 常称  $\mathbf{D}^k$  为 (与  $d^k$  对应的) 二次型矩阵.

式(5)表示了一个近似产生模型, 从代数学的观点看, 被处理矩阵集中的所有矩阵均可被近似理解为由  $V_1^+$  上的数据点  $L_{i1} \boldsymbol{\varepsilon}_1 + L_{i2} \boldsymbol{\varepsilon}_2 + \dots + L_{il_1} \boldsymbol{\varepsilon}_{l_1}$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$  和  $V_2^+$  上的数据点  $R_{1j} \boldsymbol{\eta}_1 + R_{2j} \boldsymbol{\eta}_2 + \dots + R_{l_2j} \boldsymbol{\eta}_{l_2}$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$  通过双线性型映射而来 (像式(6)那样), 不同的被分解矩阵  $\mathbf{A}^k$  ( $k = 1, 2, \dots, N$ ) 间的差异只源于数据产生时使用的双线性型不同. 双线性型在式(5)表示的模型中起了基础性的作用, 正因为此, 把由式(5)表示的非负矩阵集分解命名为基于双线性型的非负矩阵集分解.

从认知学的角度分析, BFBNMSF 继承了 NMF 的构造特点, 考虑到了感知的特性 (感知是一个纯加性的生理过程), BFBNMSF 模型也要求所有分解量均为非负值,  $\mathbf{L}$  和  $\mathbf{R}$  代表了特征,  $D_{ab}^k$  代表了因感知  $\mathbf{A}^k$  而对  $\mathbf{L}_a$  和  $\mathbf{R}_b$  的响应强度. 此外, BFBNMSF 并未对  $V_1$  和  $V_2$  的性质做任何的要求, 并且  $\{\boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_2, \dots, \boldsymbol{\varepsilon}_{l_1}\}$  和  $\{\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \dots, \boldsymbol{\eta}_{l_2}\}$  是潜在的、无非负限制的, 它们在数学上的层次高于式(5)表示的 BFBNMSF 模型, 如果说式(5)表示的模型与感知层的神经活动有

关, 那么  $\{\boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_2, \dots, \boldsymbol{\varepsilon}_{l_1}\}$  和  $\{\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \dots, \boldsymbol{\eta}_{l_2}\}$  应可解释为与比感知更深一层次的神经活动相关,  $d^k$  表示了这一层与感知层间的联系方式 (或过程).

### 3.4 BFBNMSF 的优化模型

从算法的可实现性考虑, 将式(4)中  $f_{A^k}$  取为欧几里德距离的平方最好, 因为这时可用高等代数学的方法对目标函数做分解从而使优化过程中每次操作对应的优化问题清晰直观且易解 (见对式(9)~式(11)的推导和求解). 那么, BFBNMSF 可归结为如下的优化问题:

$$\min_{\substack{0 \leq \mathbf{L}, \mathbf{R}, \mathbf{D}^k, \\ k=1, 2, \dots, N}} \sum_{k=1}^N \|\mathbf{A}^k - (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)\|_F^2 \quad (7)$$

其中  $\boldsymbol{\varepsilon}_X$  是与  $\mathbf{X}$  同大小的矩阵或向量, 它中的所有元素均为  $\varepsilon$  (一个非常小的正数). 引入  $\boldsymbol{\varepsilon}_L$ ,  $\{\boldsymbol{\varepsilon}_{D^k}, k=1, 2, \dots, N\}$  以及  $\boldsymbol{\varepsilon}_R$  是为了避免算法推导和执行过程中出现数学上无定义的情况 (除以零).

从优化的角度看, 式(7)代表了一个典型的由  $N$  个子系统  $\|\mathbf{A}^k - (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)\|_F^2$  组成的大系统  $\sum_{k=1}^N \|\mathbf{A}^k - (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)\|_F^2$  的优化问题,  $\mathbf{D}^k, k=1, 2, \dots, N$  为局部决策变量,  $\mathbf{D}^k$  仅影响第  $k$  个子系统的性能,  $\mathbf{L}$  和  $\mathbf{R}$  为全局决策变量, 它们影响整个大系统的性能. 文献[13]认为解这类问题时应该利用这种等级化的结构, 交替地优化  $\mathbf{L}, \mathbf{R}$  和  $\mathbf{D}^k, k=1, 2, \dots, N$ , 使式(7)中的目标函数单调地下降从而得到问题的一个局部解. 这里强调, 求  $\mathbf{D}^k, k=1, 2, \dots, N$  仅是为了辅助求  $\mathbf{L}$  和  $\mathbf{R}$ , 求  $\mathbf{L}$  和  $\mathbf{R}$  是进行 BFBNMSF 学习的根本目的.

因为

$$\begin{aligned} &\sum_{k=1}^N \|\mathbf{A}^k - (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)\|_F^2 \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^n \|\mathbf{A}_j^k - (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R}_j + \boldsymbol{\varepsilon}_{R_j})\|_2^2 \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{i=1}^m \|\mathbf{A}_{i \cdot}^k - (\mathbf{L}_{i \cdot} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i \cdot}})(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)\|_2^2 \end{aligned} \quad (8)$$

所以, 对  $\mathbf{L}$  的求解可归结为: 在固定  $\mathbf{D}^k$  ( $k=1, 2, \dots, N$ ) 和  $\mathbf{R} \geq \mathbf{0}$  的情况下, 解

$$\min_{\substack{0 \leq \mathbf{L}_{i \cdot}, \\ i=1, 2, \dots, m}} \sum_{k=1}^N \|\mathbf{A}_{i \cdot}^k - (\mathbf{L}_{i \cdot} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i \cdot}})(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)\|_2^2 \quad (9)$$

对  $\mathbf{R}$  的求解可归结为: 在固定  $\mathbf{D}^k$  ( $k=1, 2, \dots, N$ ) 和

$L \geq 0$  的情况下,解

$$\min_{\substack{0 \leq \mathbf{R}_j, \\ j=1,2,\dots,n}} \sum_{k=1}^N \| \mathbf{A}^k_j - (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R}_j + \boldsymbol{\varepsilon}_{R_j}) \|_2^2 \quad (10)$$

经推导(见附录的第 3 部分)知,  $\forall p \in \{1, 2, \dots, N\}$ ,  $\forall c \in \{1, 2, \dots, l_2\}$ , 对  $\mathbf{D}^{p,c}$  的求解可归结为: 在除  $\mathbf{D}^{p,c}$  外  $\{\mathbf{D}^k \geq 0, k=1, 2, \dots, N\}$ ,  $\mathbf{L} \geq 0$  和  $\mathbf{R} \geq 0$  均固定的情况下,解

$$\min_{0 \leq \mathbf{D}^{p,c}} \frac{1}{2} (\mathbf{D}^{p,c} + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^{p,c}})^T \mathbf{S} \mathbf{T}_{cc} (\mathbf{D}^{p,c} + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^{p,c}}) + (\mathbf{D}^{p,c} + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^{p,c}})^T \left[ \sum_{a=1, a \neq c}^{l_2} \mathbf{S} (\mathbf{D}^{p,a} + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^{p,a}}) \mathbf{T}_{ac} - \mathbf{U}^{p,c} \right] \quad (11)$$

其中  $\mathbf{U}^p = (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)^T \mathbf{A}^p (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)^T$ ,  $\mathbf{S} = (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)^T (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)$ ,  $\mathbf{T} = (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)^T$ .

### 3.5 对 BFBNMSF 优化模型的统计学解释

式(5)表示的 BFBNMSF 模型可通过引入  $m \times n$  维的误差项  $\mathbf{E}^k$ ,  $k=1, 2, \dots, N$  等价地变成如下的形式:

$$\mathbf{A}^k = (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R) + \mathbf{E}^k, \quad k=1, 2, \dots, N \quad (12)$$

即认为  $\forall k \in \{1, 2, \dots, N\}$ ,  $\mathbf{A}^k$  由  $(\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)$  加随机扰动  $\mathbf{E}^k$  精确生成.

为解得  $\mathbf{L}, \mathbf{R}$  和  $\mathbf{D}^k$  ( $k=1, 2, \dots, N$ ), 可做最大似然估计, 那么

$$\{\mathbf{L}, \mathbf{R}, \mathbf{D}^k, k=1, 2, \dots, N\} = \arg \max_{\substack{0 \leq \mathbf{L}, \mathbf{R}, \mathbf{D}^k, \\ k=1, 2, \dots, N}} \prod_{k=1}^N \log P(\mathbf{A}^k | \mathbf{L}, \mathbf{R}, \mathbf{D}^k) \quad (13)$$

假定  $E_{ij}^k \sim N(0, \delta_{ij}^k)$ , 那么

$$P(\mathbf{A}^k_{ij} | \mathbf{L}, \mathbf{D}^k, \mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^k} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \frac{\mathbf{A}^k_{ij} - [(\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R}_j + \boldsymbol{\varepsilon}_{R_j})]_{ij}}{\sigma_{ij}^k} \right]^2 \right\} \quad (14)$$

假定  $E_{ij}^k$  ( $i=1, 2, \dots, m, j=1, 2, \dots, n, k=1, 2, \dots, N$ ) 间是统计独立的, 则

$$\begin{aligned} & \prod_{k=1}^N \log P(\mathbf{A}^k | \mathbf{L}, \mathbf{D}^k, \mathbf{R}) \\ &= \prod_{i=1}^m \prod_{j=1}^n \prod_{k=1}^N \log P(\mathbf{A}^k_{ij} | \mathbf{L}, \mathbf{D}^k, \mathbf{R}) \\ &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^N -\frac{1}{2} \left\{ \left\{ \mathbf{A}^k_{ij} - [(\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R}_j + \boldsymbol{\varepsilon}_{R_j})]_{ij} \right\} / \sigma_{ij}^k \right\}^2 + \log(\sqrt{2\pi}\sigma_{ij}^k) \end{aligned} \quad (15)$$

那么式(13)的最大似然估计等价于

$$\begin{aligned} & \{\mathbf{L}, \mathbf{R}, \mathbf{D}^k, k=1, 2, \dots, N\} = \\ & \arg \min_{\substack{0 \leq \mathbf{L}, \mathbf{R}, \mathbf{D}^k, \\ k=1, 2, \dots, N}} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^N \cdot \\ & \left\{ \left\{ \mathbf{A}^k_{ij} - [(\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R}_j + \boldsymbol{\varepsilon}_{R_j})]_{ij} \right\} / \sigma_{ij}^k \right\}^2 \end{aligned} \quad (16)$$

进一步假设  $\delta_{ij}^k = \text{常数}$ , 则式(16)等价于

$$\begin{aligned} & \{\mathbf{L}, \mathbf{R}, \mathbf{D}^k, k=1, 2, \dots, N\} = \\ & \arg \min_{\substack{0 \leq \mathbf{L}, \mathbf{R}, \mathbf{D}^k, \\ k=1, 2, \dots, N}} \sum_{k=1}^N \|\mathbf{A}^k - (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R}_j + \boldsymbol{\varepsilon}_{R_j})\|_F^2 \end{aligned} \quad (17)$$

因此, 式(7)表示的 BFBNMSF 优化模型实际是在假定  $E_{ij}^k$  ( $i=1, 2, \dots, m, j=1, 2, \dots, n, k=1, 2, \dots, N$ ) 独立同正态分布的情况下对  $\mathbf{L}, \mathbf{R}$  和  $\mathbf{D}^k$  ( $k=1, 2, \dots, N$ ) 做最大似然估计.

### 3.6 BFBNMSF 算法

根据 3.4 节中的优化模型, 可推得如下 4 个定理(证明见附录).

**定理 1.** 在  $\mathbf{R} \geq 0$  和  $\{\mathbf{D}^k \geq 0, k=1, 2, \dots, N\}$  固定的情况下, 令  $\mathbf{L}(\text{present})$  是非负的, 按  $\mathbf{L}(\text{new}) = \mathbf{L}(\text{present}) \otimes$

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^N \mathbf{A}^k [(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)]^T \odot \\ & \{[\mathbf{L}(\text{present}) + \boldsymbol{\varepsilon}_L] \sum_{k=1}^N [(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)] \cdot \\ & [(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_R)]^T\} \end{aligned} \quad (18)$$

调整  $\mathbf{L}$  可使式(7)中的 BFBNMSF 目标函数值下降且  $\mathbf{L}(\text{new})$  非负 ( $\otimes$  和  $\odot$  分别代表哈达马乘和除, 在  $(\cdot)$  中写  $\text{present}$  代表当前的状态, 在  $(\cdot)$  中写  $\text{new}$  代表更新后的状态).

**定理 2.** 在  $\mathbf{L} \geq 0$  和  $\{\mathbf{D}^k \geq 0, k=1, 2, \dots, N\}$  固定的情况下, 令  $\mathbf{R}(\text{present})$  是非负的, 按

$$\begin{aligned} & \mathbf{R}(\text{new}) = \mathbf{R}(\text{present}) \otimes \\ & \sum_{k=1}^N [(\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})]^T \mathbf{A}^k \odot \\ & \left\{ \sum_{k=1}^N [(\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})]^T \cdot \right. \\ & \left. [(\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_L)(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})][\mathbf{R}(\text{present}) + \boldsymbol{\varepsilon}_R] \right\} \end{aligned} \quad (19)$$

调整  $\mathbf{R}$  可使式(7)中的 BFBNMSF 目标函数值下降且  $\mathbf{R}(\text{new})$  非负.

**定理 3.**  $\forall p \in \{1, 2, \dots, N\}$ ,  $\forall c \in \{1, 2, \dots,$

$l_2\}$ , 记  $U^p = (L + \epsilon_L)^T A^p (R + \epsilon_R)^T$ ,  $S = (L + \epsilon_L)^T (L + \epsilon_L)$ ,  $T = (R + \epsilon_R)(R + \epsilon_R)^T$ ,  $V_c^p = U_c^p - \sum_{a=1, a \neq c}^{l_2} S(D_c^p + \epsilon_{D_c^p}) T_{ac}$ , 如果  $\forall i \in \{1, 2, \dots, l_1\}$ ,  $V_{ic}^p \geq 0$ , 在除  $D_c^p$  外的  $\{D^k \geq 0, k=1, 2, \dots, N\}$ ,  $L \geq 0$  和  $R \geq 0$  固定的情况下, 令  $D_c^p(\text{present})$  是非负的, 按

$$D_c^p(\text{new}) = V_c^p \otimes D_c^p(\text{present}) \odot \{ST_{cc}[D_c^p(\text{present}) + \epsilon_{D_c^p}]\} \quad (20)$$

调整  $D_c^p$  可使式(7)中的 BFBNMSF 目标函数值下降且  $D_c^p(\text{new})$  非负.

**定理 4.** 在除  $D_{qc}^p$  外的  $\{D^k \geq 0, k=1, 2, \dots, N\}$ ,  $L$  和  $R$  固定的情况下, 式(7)中的 BFBNMSF 目标函数在

$$D_{qc}^p(\text{new}) = \max\{-\epsilon + \{V_{qc}^p - \sum_{j=1, j \neq q}^{l_1} [ST_{cc}]_{qj}(D_{jc}^p + \epsilon)\} / [ST_{cc}]_{qq}, 0\} \quad (21)$$

处达到对  $D_{qc}^p$  有非负限制时的最小值(如果  $x \geq 0$ ,  $\max\{x, 0\}$  不改变  $x$ ; 如果  $x < 0$ ,  $\max\{x, 0\}$  使  $x$  取零).

根据定理 1~定理 4, 可构造如图 3 所示的单调 BFBNMSF 算法(伪码表示).

```

Input:  $\{A^k, k=1, 2, \dots, N\}$  以及  $l_1, l_2$ 
随机初始化  $L > 0, R > 0$  和  $\{D^k > 0, k=1, 2, \dots, N\}$ 
重复如下操作, 直到收敛
    依定理 1 执行式(18)
    依定理 2 执行式(19)
     $p$  从 1 到  $N$  do:
         $c$  从 1 到  $l_2$  do:
            如果  $\forall i \in \{1, 2, \dots, l_1\}, V_{ic}^p \geq 0$ 
                依定理 3 执行式(20)
            否则
                 $q$  从 1 到  $l_1$  do:
                    依定理 4 执行式(21)
Output:  $L, R$  和  $\{D^k, k=1, 2, \dots, N\}$ 
    
```

图 3 伪码表示的 BFBNMSF 算法

## 4 实 验

这部分利用一些实验验证处理数据矩阵集时, BFBNMSF 比 NMF 描述力强、推广性好. 由于主分量分析(Principal Component Analysis, PCA)<sup>[14]</sup> 是最常用的数据描述工具, 所以在所有的比较实验中, PCA 也作为被比较方法之一. 为使通过实验得出的验证结论客观, 本节中, 每一验证实验都将基于多组数据进行, 这些组数据在样本量和数据类型等方面存在差异.

### 4.1 描述力

比较这 3 种描述方法在描述力上的差异, 需设定统一的参照指标, 这个指标定为压缩率最合理. 假设被处理数据矩阵集为  $\{A^k, k=1, 2, \dots, N\}$ ,  $A^k$  是  $m \times n$  维的, 根据压缩率的定义<sup>[15]</sup>, 做 BFBNMSF 时的压缩率为  $mnN / [(ml_1 + nl_2) + l_1 l_2 N]$ , 做 NMF 时的压缩率为  $mnN / (mnL + LN)$ , 做 PCA 时的压缩率也为  $mnN / (mnL + LN)$  (PCA 基矩阵的列维也用  $L$  表示).

这里的实验共使用 3 组数据, 它们分别是 ORL 人脸数据库的 400 幅图、PIE 人脸数据库子库(所有人的正面光照下的各种姿态图)的共 884 幅图和 MIT 行人数据库的 924 幅图<sup>①</sup>.

利用这 3 组数据, 3 种被比较方法的描述力(用作处理后重建的数据与原始数据间的相对误差表示)分别在不同压缩率(压缩率约为 2 的 1 次到 7 次幂)下被计算, 图 4、图 6 和图 8 依次勾画了 3 种被比较方法基于这 3 组数据的  $\log_2$ (压缩率)-(平均)相对误差曲线. 图 4、图 6 和图 8 的纵坐标均为(平均)相对误差, 这是指: 为了客观, 图上有关 BFBNMSF 和 NMF 的每个数据点都是相同实验设置下 10 次随机初始化得到的 10 个解的相对误差的平均值;

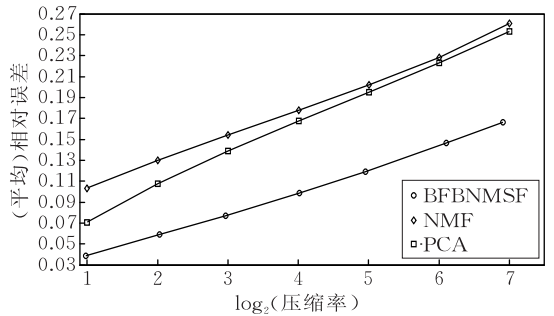


图 4 BFBNMSF、NMF 和 PCA 间的描述力比较 (基于 ORL 人脸数据库)

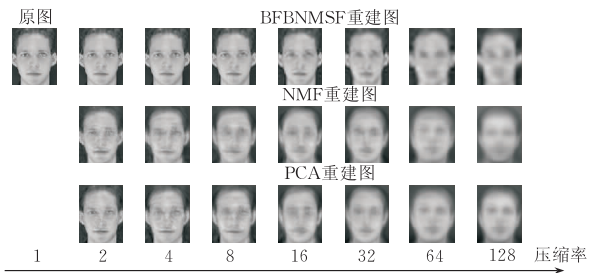


图 5 BFBNMSF、NMF 和 PCA 间的描述力比较示例 (示例中原图取自 ORL 人脸数据库)

① MIT CBCL PEDESTRIAN database, at MIT CBCL Center for Biological and Computational Learning. <http://cbcl.mit.edu/software/datasets/PedestrianData.html>.

PCA 是有解析解的方法,有关 PCA 的数据点仅由一次计算得到,它不需由多次计算取平均而得. BFBNMSF 的曲线在图 4、图 6 和图 8 中均始终列于最下方且基本上远离 NMF 和 PCA 的曲线,这说明同压缩率下,BFBNMSF 比 NMF 和 PCA 对矩阵集描述准确得多.

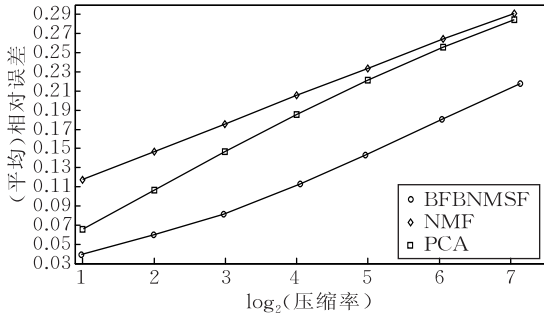


图 6 BFBNMSF、NMF 和 PCA 间的描述力比较 (基于 PIE 人脸数据库的子库)

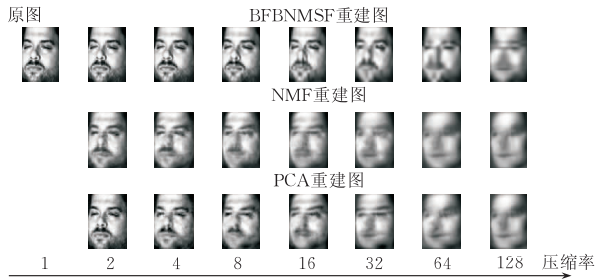


图 7 BFBNMSF、NMF 和 PCA 间的描述力比较示例 (示例中原图取自 PIE 人脸数据库)

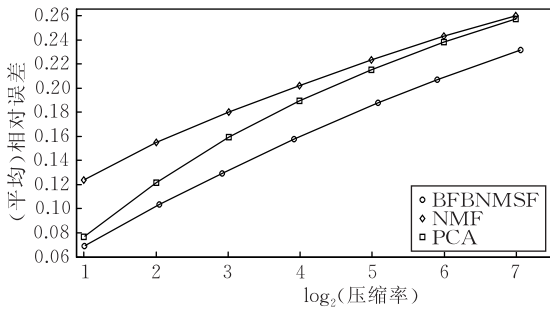


图 8 BFBNMSF、NMF 和 PCA 间的描述力比较 (基于 MIT 行人数据库)

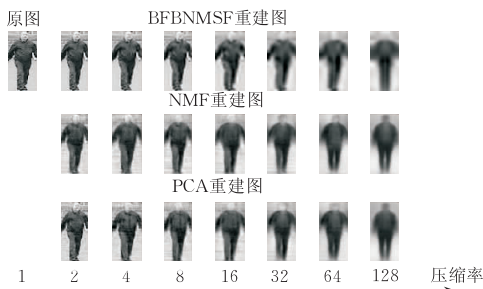


图 9 BFBNMSF、NMF 和 PCA 间的描述力比较示例 (示例中原图取自 MIT 行人数据库)

图 5、图 7 和图 9 依次对图 4、图 6 和图 8 所记录的比较结果给出了图示,这些图示直观地支持了上述结论.

### 4.2 推广性

本小节比较上述 3 种描述方法在推广性上的差异,统一的参照指标取为描述系数量. 相同描述系数量下,BFBNMSF 对训练数据的描述力通常要差于 NMF 和 PCA(因为在相同描述系数量下,做 BFBNMSF 时的压缩率常常远高于做 NMF 时和做 PCA 时的压缩率),如果此时 BFBNMSF 对测试数据的描述力好于 NMF 和 PCA,那么说明 BFBNMSF 对训练数据的描述力与对测试数据的描述力间差异小于 NMF 和 PCA 对训练数据的描述力与对测试数据的描述力间差异,即 BFBNMSF 比 NMF 和 PCA 的推广性好.

表 1 以 ORL 库的 400 幅图为训练数据,以 YALE 库、PIE 库和 UMIST 库的图像为测试数据,给出了对这 3 种方法的推广性进行比较实验的示例. 这时,在同保留 225 个描述系数的情况下,做 BFBNMSF 的压缩率(44.3)远高于做 NMF 和做 PCA 的压缩率(1.71),BFBNMSF 对训练数据的描述力差于 NMF 和 PCA(见表 1 中“训练结果示例”下重建图及其对应的重建相对误差);但 BFBNMSF 对 YALE 库、PIE 库和 UMIST 库图像的描述力远远好于 NMF 和 PCA(见表 1 中“推广性测试结果示例”下重建图及其对应的重建相对误差).

表 2 和表 3 也给出了对这 3 种方法的推广性进行比较的实验示例. 与表 1 不同的是:表 2 以 PIE 库子库(9 号摄像机获取的所有人的不同光照下图像)的 1428 幅图为训练数据,以 YALE 库、ORL 库、UMIST 库以及 PIE 库的其它子库(所有人的正面光照下各种姿态图,共 884 幅,4.1 小节中的实验用过这组数据)图像为测试数据;表 3 以 MIT 库的 924 幅图为训练数据,以 INRIA 库<sup>①</sup>图像为测试数据. 表 2 和表 3 的构造原则与表 1 一致,它们中的图例和数据也都分别直观和客观地说明了 BFBNMSF 在对训练数据的描述力差于 NMF 和 PCA 的情况下,对测试数据的描述力好于 NMF 和 PCA.

① INRIA Person Database. <http://pascal.inrialpes.fr/data/human>.

表 1 BFBNMSF、NMF 以及 PCA 间的推广性比较示例(训练数据为 ORL 人脸数据库)

方法	训练结果示例			推广性测试结果示例								
	取自 ORL 库			取自 YALE 库			取自 PIE 库			取自 UMIST 库		
原图												
$l_1 \times l_2 = 15 \times 15 / \text{压缩率} = 44.3$												
BFBNMSF												
误差	0.101	0.125	0.120	0.117	0.093	0.101	0.105	0.107	0.121	0.152	0.141	0.115
$L = 225 / \text{压缩率} = 1.71$												
NMF												
误差	0.092	0.106	0.103	0.268	0.268	0.244	0.180	0.196	0.173	0.249	0.227	0.233
$L = 225 / \text{压缩率} = 1.71$												
PCA												
误差	0.060	0.693	0.077	0.200	0.184	0.191	0.153	0.153	0.150	0.192	0.167	0.202

注: (1) 训练数据为 ORL 库的全部 400 幅图; (2) 压缩率指对训练数据的压缩率; (3) 误差指重建时的相对误差.

表 2 BFBNMSF、NMF 以及 PCA 间的推广性比较示例(训练数据为 PIE 人脸数据库的子库)





















方法	训练结果示例			推广性测试结果示例											
	取自 PIE 库的子库			取自 YALE 库			取自 ORL 库			取自 UMIST 库			取自 PIE 库的其它子库		
原图															
$l_1 \times l_2 = 15 \times 15 / \text{压缩率} = 35.69$															
BFBNMSF															
误差	0.090	0.096	0.102	0.135	0.113	0.109	0.113	0.129	0.147	0.158	0.151	0.129	0.147	0.118	0.179
$L = 225 / \text{压缩率} = 5.40$															
NMF															
误差	0.063	0.056	0.058	0.271	0.240	0.228	0.155	0.166	0.197	0.256	0.269	0.243	0.232	0.166	0.247
$L = 225 / \text{压缩率} = 5.40$															
PCA															
误差	0.042	0.034	0.035	0.181	0.166	0.158	0.136	0.158	0.159	0.186	0.189	0.185	0.192	0.150	0.203

注: (1) 训练数据为 PIE 库中由 9 号摄像机获取的 1428 幅图; (2) 压缩率指对训练数据的压缩率; (3) 误差指重建时的相对误差; (4) 测试用 PIE 库图像从左到右分别由 5、29 和 7 号摄像机拍摄(与训练图的拍摄角度不同).

表 3 BFBNMSF、NMF 以及 PCA 间的推广性比较示例(训练数据为 MIT 行人数据库)

方法	训练结果示例(取自 MIT 库)			推广性测试结果示例(取自 INRIA 库)								
	原图											
$l_1 \times l_2 = 15 \times 15 / \text{压缩率} = 19.35$												
BFBNMSF												
误差	0.165	0.161	0.168	0.143	0.170	0.136	0.162	0.162	0.162	0.147	0.135	0.135

(续 表)

		$L=225/\text{压缩率}=3.39$									
NMF	重建										
	误差	0.141	0.153	0.131	0.196	0.239	0.221	0.218	0.234	0.225	0.204
		$L=225/\text{压缩率}=3.39$									
PCA	重建										
	误差	0.085	0.119	0.083	0.167	0.208	0.178	0.202	0.183	0.169	0.178

注:(1)训练数据为 MIT 库的全部 924 幅图;(2)压缩率指对训练数据的压缩率;(3)误差指重建时的相对误差。

由表 1、表 2 和表 3 可得到的共同结论是:训练数据为数据矩阵集时,BFBNMSF 结果的推广性比 NMF 和 PCA 结果的推广性要好得多。

## 5 结 论

非负矩阵分解(NMF)是一个较新的但越来越常用的非负多元数据描述方法.NMF 的处理对象本质上是向量集,为使数据矩阵集能适于用 NMF 处理,矩阵集中的矩阵要被逐一矢量化.这常使对应的 NMF 学习问题成为典型的小样本问题,从而使 NMF 结果的描述力不强、推广性差,最终使处理数据矩阵集时 NMF 的可应用性变差.取 NMF 之长,补 NMF 之短,本文提出了非负矩阵集分解(NMSF)的概念,在 NMSF 的框架下,重点研究了基于双线性型的非负矩阵集分解(BFBNMSF),分析了 BFBNMSF 的基本属性,讨论了 BFBNMSF 的构造特点和优化模型,实现了一个单调的 BFBNMSF 算法.

理论分析和实验结果均表明:处理数据矩阵集时,BFBNMSF 比 NMF 的描述力强、推广性好.此外,在实验比较中,最常用的数据描述方法——PCA 也被作为了被比较项之一,实验的结果还揭示出:处理数据矩阵集时,BFBNMSF 也比 PCA 描述力强、推广性好.需要指出,更强的描述力和更好的推广性意味着由 BFBNMSF 提取出的数据矩阵特征要比由 NMF 和 PCA 提取出的数据矩阵特征更为本质.

本文中提出的 NMSF 为解决 NMF 处理数据矩阵集时遇到的问题提供了一个一般性的操作框架,不同的 NMSF 实现形式可被采用.不同实现形式的 NMSF 算法将蕴涵不同的代数学、认知学和统

计学解释,将有不同的特性.实现蕴涵某种或某些期望特性的其他 NMSF 算法将是进一步的研究目标.

## 参 考 文 献

- [1] Lee D D, Seung H S. Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization. *Nature*, 1999, 401(6755): 788-791
- [2] Palmer S E. Hierarchical structure in perceptual representation. *Cognitive Psychology*, 1977, 9(3): 441-474
- [3] Wachsmuth E, Oram M W, Perrett D I. Recognition of objects and their component parts; Responses of single units in the temporal cortex of the macaque. *Cerebral Cortex*, 1994, 4(5): 509-522
- [4] Logothetis N K, Sheinberg D L. Visual object recognition. *Annual Review of Neuro-Science*, 1996, 19(1): 577-621
- [5] Field D J. What is the goal of sensory coding? *Neural Computation*, 1994, 6(4): 559-601
- [6] Li Le, Zhang Yu-Jin. Survey on algorithms of non-negative matrix factorization. *Acta Electronica Sinica*, 2007, 36(4): 737-743(in Chinese)  
(李乐, 章毓晋. 非负矩阵分解算法综述. *电子学报*, 2008, 36(4): 737-743)
- [7] Hoyer P O. Non-negative matrix factorization with sparseness constraints. *Journal of Machine Learning Research*, 2004, 5(9): 1457-1469
- [8] Heiler M, Schnorr C. Learning sparse representations by non-negative matrix factorization and sequential cone programming. *Journal of Machine Learning Research*, 2006, 7(7): 1385-1407
- [9] Lee D D, Seung H S. Algorithms for non-negative matrix factorization. *Advance in Neural Information Processing Systems (NIPS)*. Cambridge: MIT Press, 2000
- [10] Sim T, Baker S, Bsat M. The CMU pose, illumination, and expression database. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2003, 25(12): 1615-1618

[11] Yang J, Zhang D, Frangi A F, Yang J Y. Two-dimensional PCA: A new approach to appearance-based face representation and recognition. *IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2004, 26(1): 131-137

[12] Zhang Xian-Ke, Xu Pu-Hua. *Higher Algebra*. 2nd Edition. Beijing: Tsinghua University Press, 2004(in Chinese)  
(章贤科, 许普华. 高等代数学. 第2版. 北京:清华大学出版社, 2004)

[13] Bertsekas D P. *Nonlinear Programming*. Belmont: Athena

Scientific, 1999

[14] Jolliffe I T. *Principal Component Analysis*. 2nd Edition. Springer-Verlag, 2002

[15] Zhang Yu-Jin. *Image Engineering (Volume 1: Image Processing)*. 2nd Edition. Beijing: Tsinghua University Press, 2006(in Chinese)  
(章毓晋. 图像工程(上册——图像处理). 第2版. 北京:清华大学出版社, 2006)

附录. 对定理 1~定理 4 的证明.

定义. 如果  $Q(\mathbf{H}, \mathbf{G}) \geq F(\mathbf{H})$ , 当且仅当  $\mathbf{G} = \mathbf{H}$  时有  $Q(\mathbf{H}, \mathbf{G}) = F(\mathbf{H})$ , 则  $Q(\mathbf{H}, \mathbf{G})$  称为  $F(\mathbf{H})$  的二元辅助函数.

为之后推导方便, 这里预先给出 2 个引理.

引理 1. 如果  $Q(\mathbf{H}, \mathbf{G})$  为  $F(\mathbf{H})$  的二元辅助函数, 且  $\mathbf{G}$  固定后,  $Q(\mathbf{H}, \mathbf{G})$  是  $\mathbf{H}$  的严格凸函数, 则依照

$$\mathbf{H}^{t+1} = \underset{\mathbf{H}}{\operatorname{argmin}} Q(\mathbf{H}, \mathbf{H}^t) \quad (\text{A1})$$

调整  $\mathbf{H}$  可使  $F(\mathbf{H})$  严格单调下降.  $\mathbf{H}^t$  和  $\mathbf{H}^{t+1}$  分别为  $\mathbf{H}$  的当前值和更新后的值.

证明.  $F(\mathbf{H}^{t+1}) \leq Q(\mathbf{H}^{t+1}, \mathbf{H}^t) < Q(\mathbf{H}^t, \mathbf{H}^t) = F(\mathbf{H}^t)$ .

引理 2.  $\mathbf{a}$  为一向量,  $\operatorname{diag}\{\mathbf{a}\}$  为以  $\mathbf{a}$  的元素为对角线元素的对称阵,  $\mathbf{A}$  为与  $\operatorname{diag}\{\mathbf{a}\}$  大小相同的对称阵,  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  为  $\mathbf{A}$  的特征值, 则  $a_1^2 \lambda_1, a_2^2 \lambda_2, \dots, a_n^2 \lambda_n$  为  $\operatorname{diag}\{\mathbf{a}\} \mathbf{A} \operatorname{diag}\{\mathbf{a}\}$  的特征值.

证明. 对  $\mathbf{A}$  做特征值分解有  $\mathbf{A} = \mathbf{D}^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{D}$ ,  $\boldsymbol{\Sigma} = \operatorname{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$  为以  $\mathbf{A}$  的特征值为对角线元素的对称阵,  $\mathbf{D}$  是由  $\mathbf{A}$  的特征向量组成的矩阵且  $\mathbf{D}$  中特征向量的排放顺序与特征值在  $\boldsymbol{\Sigma}$  的对角线上的排放顺序一致, 则  $\operatorname{diag}\{\mathbf{a}\} \mathbf{A} \operatorname{diag}\{\mathbf{a}\} = (\mathbf{D} \operatorname{diag}\{\mathbf{a}\})^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{D} \operatorname{diag}\{\mathbf{a}\} = \mathbf{D}^T (\operatorname{diag}\{\mathbf{a}\} \boldsymbol{\Sigma} \operatorname{diag}\{\mathbf{a}\}) \mathbf{D} = \mathbf{D}^T \operatorname{diag}\{a_1^2 \lambda_1, a_2^2 \lambda_2, \dots, a_n^2 \lambda_n\} \mathbf{D}$ .

1. 对定理 1 的证明

要处理的优化问题为: 在固定  $\{\mathbf{D}^k \geq \mathbf{0}, k=1, 2, \dots, N\}$  和  $\mathbf{R} \geq \mathbf{0}$  的情况下, 解

$$\min_{\substack{0 \leq L_{i.} \\ i=1, 2, \dots, m}} \sum_{k=1}^N \| \mathbf{A}_i^k - (\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) (\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k}) (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}}) \|_2^2 \quad (\text{A2})$$

直接对式 (A2) 优化是很困难的, 这里解决此难题的思路是构造一个辅助函数, 通过优化它来优化式 (A2). 这个辅助函数的基本特点是存在解析解, 因此对其做优化非常简单 (这种构造思路在以后的几个定理证明中也是要反复用到的, 之后就不再赘述了).  $L_{i.}$  的目标函数可精简为

$$F_L(L_{i.}) = \sum_{k=1}^N (\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) (\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k}) (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}}) \cdot [(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k}) (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})]^T (\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})^T - 2\mathbf{A}_i^k [(\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) (\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k}) (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})]^T \quad (\text{A3})$$

令  $(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k}) (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}}) = \mathbf{H}^k$ ,  $(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k}) (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}}) [(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k}) (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})]^T = \mathbf{C}^k$ . 取

$$[\mathbf{K}_L^k(\mathbf{B}_{i.})]_{ab} = \delta_{ab} [(\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{C}^k]_a / (B_{ia} + \varepsilon_1) \quad (\text{A4})$$

选  $0 < \varepsilon_1 < \varepsilon$ . 依照文献 [9] 中的思路, 构造

$$Q_L(L_{i.}, \mathbf{B}_{i.}) = F_L(\mathbf{B}_{i.}) + \sum_{k=1}^N (\mathbf{L}_{i.} - \mathbf{B}_{i.}) \mathbf{K}_L^k(\mathbf{B}_{i.}) (\mathbf{L}_{i.} - \mathbf{B}_{i.})^T + 2(\mathbf{L}_{i.} - \mathbf{B}_{i.}) [(\mathbf{C}^k(\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}))^T - \mathbf{H}^k \mathbf{A}_i^{k,T}] \quad (\text{A5})$$

显然  $Q_L(L_{i.}, \mathbf{L}_{i.}) = F_L(L_{i.})$ .

因为

$$\begin{aligned} F_L(L_{i.}) &= \sum_{k=1}^N -2\mathbf{A}_i^k [(\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{H}^k]^T + (\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{C}^k (\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})^T \\ &= \sum_{k=1}^N -2\mathbf{A}_i^k [(\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{H}^k]^T + (\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{C}^k (\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})^T - (\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{C}^k (\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})^T + (\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{C}^k (\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})^T - 2\mathbf{A}_i^k [(\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{H}^k]^T + 2\mathbf{A}_i^k [(\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{H}^k]^T \\ &= F_L(\mathbf{B}_{i.}) + \sum_{k=1}^N (\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{C}^k (\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})^T + (\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{C}^k (\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})^T - 2(\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{C}^k (\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})^T + 2(\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{C}^k (\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})^T - 2(\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{C}^k (\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})^T - 2\mathbf{A}_i^k [(\mathbf{L}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{H}^k]^T + 2\mathbf{A}_i^k [(\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}) \mathbf{H}^k]^T \\ &= F_L(\mathbf{B}_{i.}) + \sum_{k=1}^N (\mathbf{L}_{i.} - \mathbf{B}_{i.}) \mathbf{C}^k (\mathbf{L}_{i.} - \mathbf{B}_{i.})^T + 2(\mathbf{L}_{i.} - \mathbf{B}_{i.}) [(\mathbf{C}^k(\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}}))^T - \mathbf{H}^k \mathbf{A}_i^{k,T}] \quad (\text{A6}) \end{aligned}$$

所以  $Q_L(L_{i.}, \mathbf{B}_{i.}) - F_L(L_{i.}) = (\mathbf{L}_{i.} - \mathbf{B}_{i.}) \left[ \sum_{k=1}^N \mathbf{K}_L^k(\mathbf{B}_{i.}) - \mathbf{C}^k \right] (\mathbf{L}_{i.} - \mathbf{B}_{i.})^T$ . 根据引理 2,  $\forall k \in \{1, 2, \dots, N\}$ ,  $\mathbf{K}_L^k(\mathbf{B}_{i.}) - \mathbf{C}^k$  半正定当且仅当  $\operatorname{diag}\{(\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})\} [\mathbf{K}_L^k(\mathbf{B}_{i.}) - \mathbf{C}^k] \cdot \operatorname{diag}\{(\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})\}$  半正定.  $\boldsymbol{\varepsilon}_{1_X}$  与  $\boldsymbol{\varepsilon}_X$  以同样的方式定义, 但  $\boldsymbol{\varepsilon}_{1_X}$  的所有元素均为  $\varepsilon_1$ .  $\forall v \in R^1$ , 仿照文献 [9] 中的思路, 有

$$v^T \operatorname{diag}\{(\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})\} \mathbf{K}_L^k(\mathbf{B}_{i.}) \operatorname{diag}\{(\mathbf{B}_{i.} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i.}})\} v = \sum_{a=1}^{l_1} \sum_{b=1}^{l_1} v_a (B_{ia} + \varepsilon_1) (B_{ib} + \varepsilon_1) v_b \delta_{ab} \cdot$$

$$\begin{aligned}
& [(\mathbf{B}_{i\cdot} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i\cdot}})\mathbf{C}^k]_a / (B_{ia} + \varepsilon_1) \\
&= \sum_{a=1}^{l_1} v_a^2 (B_{ia} + \varepsilon_1) \sum_{j=1}^{l_1} (B_{ij}^k + \varepsilon) [\mathbf{C}^k]_{ja} \\
&= \sum_{a=1}^{l_1} \sum_{b=1}^{l_1} (B_{ia} + \varepsilon_1) (B_{ib} + \varepsilon_1) [\mathbf{C}^k]_{ba} \left( \frac{1}{2} v_a^2 + \frac{1}{2} v_b^2 \right) + \\
& \quad \sum_{a=1}^{l_1} \sum_{b=1}^{l_1} (B_{ia} + \varepsilon_1) (\varepsilon - \varepsilon_1) [\mathbf{C}^k]_{ba} v_a^2 \quad (A7)
\end{aligned}$$

那么,

$$\begin{aligned}
& \mathbf{v}^T \text{diag}\{(\mathbf{B}_{i\cdot} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i\cdot}})\} [\mathbf{K}_L^k(\mathbf{B}_{i\cdot}) - \mathbf{C}^k] \text{diag}\{(\mathbf{B}_{i\cdot} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i\cdot}})\} \mathbf{v} \\
&= \sum_{a=1}^{l_1} \sum_{b=1}^{l_1} (B_{ia} + \varepsilon_1) (B_{ib} + \varepsilon_1) [\mathbf{C}^k]_{ba} \left( \frac{1}{2} v_a^2 + \frac{1}{2} v_b^2 \right) + \\
& \quad \sum_{a=1}^{l_1} \sum_{b=1}^{l_1} (B_{ia} + \varepsilon_1) (\varepsilon - \varepsilon_1) [\mathbf{C}^k]_{ba} v_a^2 - \\
& \quad \sum_{a=1}^{l_1} \sum_{b=1}^{l_1} v_a (B_{ia} + \varepsilon_1) [\mathbf{C}^k]_{ab} (B_{ib} + \varepsilon_1) v_b \\
&= \sum_{a=1}^{l_1} \sum_{b=1}^{l_1} [\mathbf{C}^k]_{ab} (B_{ia} + \varepsilon_1) (B_{ib} + \varepsilon_1) \left( \frac{1}{2} v_a^2 + \frac{1}{2} v_b^2 - v_a v_b \right) + \\
& \quad \sum_{a=1}^{l_1} \sum_{b=1}^{l_1} [\mathbf{C}^k]_{ab} (\varepsilon - \varepsilon_1) (B_{ia} + \varepsilon_1) v_a^2 \geq 0 \quad (A8)
\end{aligned}$$

因此,  $Q_L(\mathbf{L}_{i\cdot}, \mathbf{B}_{i\cdot}) - F_L(\mathbf{L}_{i\cdot}, \mathbf{B}_{i\cdot}) \geq 0$ . 根据定义,  $Q_L(\mathbf{L}_{i\cdot}, \mathbf{B}_{i\cdot})$  是  $F_L(\mathbf{L}_{i\cdot})$  的二元辅助函数. 固定  $\{\mathbf{D}^k \geq \mathbf{0}, k=1, 2, \dots, N\}$ ,  $\mathbf{R} \geq \mathbf{0}$  和  $\mathbf{B}_{i\cdot} \geq \mathbf{0}$ ,  $Q_L(\mathbf{L}_{i\cdot}, \mathbf{B}_{i\cdot})$  是  $\mathbf{L}_{i\cdot}$  的严格凸函数, 所以在  $Q_L(\mathbf{L}_{i\cdot}, \mathbf{B}_{i\cdot})$  的唯一最小值处有

$$\begin{aligned}
\frac{\partial Q_L(\mathbf{L}_{i\cdot}, \mathbf{B}_{i\cdot})}{\partial \mathbf{L}_{i\cdot}} &= 2 \sum_{k=1}^N (\mathbf{L}_{i\cdot} - \mathbf{B}_{i\cdot}) \mathbf{K}_L^k(\mathbf{B}_{i\cdot}) - \\
& \quad [\mathbf{A}_i^k \mathbf{H}^{kT} - (\mathbf{B}_{i\cdot} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i\cdot}}) \mathbf{C}^k] = 0 \quad (A9)
\end{aligned}$$

那么, 此最小值点处,

$$\mathbf{L}_{i\cdot} = \mathbf{B}_{i\cdot} + \sum_{k=1}^N [\mathbf{A}_i^k \mathbf{H}^{kT} - (\mathbf{B}_{i\cdot} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i\cdot}}) \mathbf{C}^k] \left\{ \sum_{k=1}^N [\mathbf{K}_L^k(\mathbf{B}_{i\cdot})] \right\}^{-1} \quad (A10)$$

根据引理 1,

$$F_L(\mathbf{L}_{i\cdot}) < F_L(\mathbf{B}_{i\cdot}) \quad (A11)$$

当仅考虑  $L_{ij}$ , 由式(A10)有

$$L_{ij} = -\varepsilon_1 + \frac{(B_{ij} + \varepsilon_1) \left[ \sum_{k=1}^N \mathbf{A}_i^k \mathbf{H}^{kT} \right]_j}{\left[ (\mathbf{B}_{i\cdot} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i\cdot}}) \sum_{k=1}^N \mathbf{C}^k \right]_j} \quad (A12)$$

取  $\varepsilon_1 \rightarrow 0$ , 则

$$L_{ij} = \frac{B_{ij} \left[ \sum_{k=1}^N \mathbf{A}_i^k \mathbf{H}^{kT} \right]_j}{\left[ (\mathbf{B}_{i\cdot} + \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{i\cdot}}) \sum_{k=1}^N \mathbf{C}^k \right]_j} \quad (A13)$$

令  $\mathbf{B} = \mathbf{L}(\text{present})$  和  $\mathbf{L} = \mathbf{L}(\text{new})$  分别为  $\mathbf{L}$  的当前值和更新后的值, 把式(A13)用矩阵形式表示并把  $\mathbf{C}^k$  和  $\mathbf{H}^k$  的表达式代入式(A13), 根据式(A11)有: 在  $\mathbf{R} \geq \mathbf{0}$  和  $\{\mathbf{D}^k \geq \mathbf{0}, k=1, 2, \dots, N\}$  固定的情况下, 按

$$\begin{aligned}
\mathbf{L}(\text{new}) &= \mathbf{L}(\text{present}) \otimes \sum_{k=1}^N \mathbf{A}^k [(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})]^T \odot \\
& \quad \left\{ [\mathbf{L}(\text{present}) + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}}] \sum_{k=1}^N [(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})] \cdot \right. \\
& \quad \left. [(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})]^T \right\} \quad (A14)
\end{aligned}$$

调整  $\mathbf{L}$ , 可使 BFBNMSF 目标函数值下降. 令  $\mathbf{L}(\text{present})$  是非负的, 则  $\mathbf{L}(\text{new})$  也是非负的, 因为这时式(A14)右边的所有变量值都是非负的.  $\otimes$  和  $\odot$  分别代表哈达马乘和除(矩阵对应元素间的乘和除).

需要指出, 如果正文式(7)中没有引入的  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}}$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}_{D^k}$  和  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}}$ . 按上述过程推导出的式(A14)将面临潜在的数学上无定义的情况(除以 0). 对于下文将出现的式(A15)和式(A30), 情况也是类似的, 不再赘述.

## 2. 对定理 2 的证明

$\mathbf{R}$  与  $\mathbf{L}$  在  $\sum_{k=1}^N \|\mathbf{A}^k - (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})\|_F^2$  中是对偶关系, 因此, 通过一个与证明定理 1 相类似的过程(证明定理 1 时, 从优化  $L_{i\cdot}$  入手, 这里从优化  $R_j$  入手, 证明思路完全一致)可得: 在  $\mathbf{L} \geq \mathbf{0}$  和  $\{\mathbf{D}^k \geq \mathbf{0}, k=1, 2, \dots, N\}$  固定的情况下, 令  $\mathbf{R}(\text{present})$  是非负的, 按

$$\begin{aligned}
\mathbf{R}(\text{new}) &= \mathbf{R}(\text{present}) \otimes \sum_{k=1}^N [(\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})]^T \mathbf{A}^k \odot \\
& \quad \left\{ \sum_{k=1}^N [(\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})]^T [(\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})] \cdot \right. \\
& \quad \left. [\mathbf{R}(\text{present}) + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}}] \right\} \quad (A15)
\end{aligned}$$

调整  $\mathbf{R}$ , 可使 BFBNMSF 目标函数值下降且  $\mathbf{R}(\text{new})$  非负.  $\mathbf{R}(\text{present})$  和  $\mathbf{R}(\text{new})$  分别代表  $\mathbf{R}$  的当前值和更新后的值.

## 3. 对定理 3 的证明

因为

$$\begin{aligned}
& \sum_{k=1}^N \|\mathbf{A}^k - (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})\|_F^2 \\
&= \sum_{k=1}^N \text{trace} \{ [\mathbf{A}^k - (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})] \cdot \\
& \quad [\mathbf{A}^k - (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})]^T \} \\
&= \sum_{k=1}^N \text{trace} \{ \mathbf{A}^k \mathbf{A}^{kT} - 2(\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}}) \mathbf{A}^{kT} + \\
& \quad (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})^T (\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})^T (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})^T \} \\
&= \sum_{k=1}^N \text{trace} \{ \mathbf{A}^k \mathbf{A}^{kT} - 2(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})^T (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})^T \mathbf{A}^k (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})^T + \\
& \quad (\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})^T (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})^T (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})(\mathbf{D}^k + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^k})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})^T \} \quad (A16)
\end{aligned}$$

所以,  $\mathbf{D}^p$  的目标函数是

$$\begin{aligned}
F_{D^p}(\mathbf{D}^p) &= \text{trace} \{ -2(\mathbf{D}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^p})^T (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})^T \mathbf{A}^p (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})^T + \\
& \quad (\mathbf{D}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^p})^T (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})^T (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})(\mathbf{D}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^p})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})^T \} \quad (A17)
\end{aligned}$$

记  $\mathbf{S} = (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})^T (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})$ ,  $\mathbf{T} = (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})^T$ ,  $\mathbf{U}^p = (\mathbf{L} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{L}})^T \mathbf{A}^p (\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{R}})^T$ ,  $\mathbf{D}^p = [\mathbf{D}^{p \cdot 1}, \mathbf{D}^{p \cdot 2}, \dots, \mathbf{D}^{p \cdot l_2}]$ .

因为

$$\begin{aligned}
 & \text{trace}\{(\mathbf{D}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^p}) \mathbf{T}\} \\
 &= \text{trace} \left\{ \begin{bmatrix} (\mathbf{D}_{i_1}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_1}^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_1}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_1}^p}) & (\mathbf{D}_{i_1}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_1}^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_2}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_2}^p}) & \cdots & (\mathbf{D}_{i_1}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_1}^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_{l_2}}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_{l_2}}^p}) \\ (\mathbf{D}_{i_2}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_2}^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_1}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_1}^p}) & (\mathbf{D}_{i_2}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_2}^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_2}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_2}^p}) & \cdots & (\mathbf{D}_{i_2}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_2}^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_{l_2}}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_{l_2}}^p}) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ (\mathbf{D}_{i_{l_2}}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_{l_2}}^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_1}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_1}^p}) & (\mathbf{D}_{i_{l_2}}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_{l_2}}^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_2}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_2}^p}) & \cdots & (\mathbf{D}_{i_{l_2}}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_{l_2}}^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_{l_2}}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_{l_2}}^p}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1l_2} \\ T_{21} & T_{22} & \cdots & T_{2l_2} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ T_{l_21} & T_{l_22} & \cdots & T_{l_2l_2} \end{bmatrix} \right\} \\
 &= \sum_{i=1}^{l_2} \sum_{j=1}^{l_2} (\mathbf{D}_{i_j}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_j}^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_j}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_j}^p}) T_{ji} \\
 &= \sum_{i=1}^{l_2} (\mathbf{D}_{i_i}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_i}^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_i}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_i}^p}) T_{ii} + \sum_{i=1}^{l_2} \sum_{j=1, j \neq i}^{l_2} (\mathbf{D}_{i_j}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_j}^p})^T \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_j}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_j}^p}) T_{ji} (1 - \delta_{ij}) \tag{A18}
 \end{aligned}$$

并且

$$\text{trace}\{(\mathbf{D}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D^p})^T \mathbf{U}^p\} = \sum_{i=1}^{l_2} (\mathbf{D}_{i_i}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_i}^p})^T \mathbf{U}_{i_i}^p \tag{A19}$$

所以  $\mathbf{D}_c^p$  的目标函数为

$$\begin{aligned}
 F_{D^p}(\mathbf{D}_c^p) &= (\mathbf{D}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p})^T \mathbf{S} T_{cc} (\mathbf{D}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p}) + \\
 & 2(\mathbf{D}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p})^T \left[ \sum_{j=1, j \neq c}^{l_2} \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_j}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_j}^p}) T_{j_c} - \mathbf{U}_c^p \right] \tag{A20}
 \end{aligned}$$

这样就完成了对正文式(11)中的目标函数的推导。

$$\begin{aligned}
 & \text{记 } \mathbf{E}_c = \mathbf{S} T_{cc}, \mathbf{V}_c^p = \mathbf{U}_c^p - \sum_{j=1, j \neq c}^{l_2} \mathbf{S}(\mathbf{D}_{i_j}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{i_j}^p}) T_{j_c}, \text{ 取} \\
 & [\mathbf{K}_{D^p}(\mathbf{Z}_c^p)]_{ab} = \delta_{ab} [\mathbf{E}_c(\mathbf{Z}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p})]_a / (\mathbf{Z}_{ac}^p + \varepsilon_1) \tag{A21}
 \end{aligned}$$

依照文献[9]中的思路,构造

$$\begin{aligned}
 Q_{D^p}(\mathbf{D}_c^p, \mathbf{Z}_c^p) &= F_{D^p}(\mathbf{D}_c^p) + (\mathbf{D}_c^p - \mathbf{Z}_c^p)^T \mathbf{K}_{D^p}(\mathbf{Z}_c^p) (\mathbf{D}_c^p - \mathbf{Z}_c^p) + \\
 & 2(\mathbf{D}_c^p - \mathbf{Z}_c^p)^T [\mathbf{E}_c(\mathbf{Z}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p}) - \mathbf{V}_c^p] \tag{A22}
 \end{aligned}$$

显然  $Q_{D^p}(\mathbf{D}_c^p, \mathbf{D}_c^p) = F_{D^p}(\mathbf{D}_c^p)$ .

仿照式(A6)的推导过程有

$$\begin{aligned}
 F_{D^p}(\mathbf{D}_c^p) &= (\mathbf{D}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p})^T \mathbf{E}_c (\mathbf{D}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p}) - 2(\mathbf{D}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p})^T \mathbf{V}_c^p \\
 &= F_{D^p}(\mathbf{Z}_c^p) + (\mathbf{D}_c^p - \mathbf{Z}_c^p)^T \mathbf{E}_c (\mathbf{D}_c^p - \mathbf{Z}_c^p) + \\
 & 2(\mathbf{D}_c^p - \mathbf{Z}_c^p)^T [\mathbf{E}_c(\mathbf{Z}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p}) - \mathbf{V}_c^p] \tag{A23}
 \end{aligned}$$

所以  $Q_{D^p}(\mathbf{D}_c^p, \mathbf{D}_c^p) - F_{D^p}(\mathbf{D}_c^p) = (\mathbf{D}_c^p - \mathbf{Z}_c^p)^T [\mathbf{K}_{D^p}(\mathbf{Z}_c^p) - \mathbf{E}_c] (\mathbf{D}_c^p - \mathbf{Z}_c^p)$ . 根据引理 2,  $\mathbf{K}_{D^p}(\mathbf{Z}_c^p) - \mathbf{E}_c$  半正定当且仅当  $\text{diag}\{(\mathbf{Z}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \mathbf{Z}_c^p)\} [\mathbf{K}_{D^p}(\mathbf{Z}_c^p) - \mathbf{E}_c] \text{diag}\{(\mathbf{Z}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \mathbf{Z}_c^p)\}$  半正定. 仿照式(A7)和式(A8)的推导过程有,  $\forall v \in R^{l_1}$ ,

$$\begin{aligned}
 & \mathbf{v}^T \text{diag}\{(\mathbf{Z}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \mathbf{Z}_c^p)\} [\mathbf{K}_{D^p}(\mathbf{Z}_c^p) - \mathbf{E}_c] \text{diag}\{(\mathbf{Z}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \mathbf{Z}_c^p)\} \mathbf{v} \\
 &= \sum_{a=1}^{l_1} \sum_{b=1}^{l_1} [\mathbf{E}_c]_{ab} (\mathbf{Z}_{ac}^p + \varepsilon_1) (\mathbf{Z}_{bc}^p + \varepsilon_1) \cdot \\
 & \left( \frac{1}{2} v_a^2 + \frac{1}{2} v_b^2 - v_a v_b \right) + \\
 & \sum_{a=1}^{l_1} \sum_{b=1}^{l_1} (\mathbf{Z}_{ac}^p + \varepsilon_1) (\varepsilon - \varepsilon_1) [\mathbf{E}_c]_{ab} v_a^2 \geq 0 \tag{A24}
 \end{aligned}$$

所以  $Q_{D^p}(\mathbf{D}_c^p, \mathbf{Z}_c^p) - F_{D^p}(\mathbf{D}_c^p) \geq 0$ . 根据定义,  $Q_{D^p}(\mathbf{D}_c^p, \mathbf{Z}_c^p)$  是  $F_{D^p}(\mathbf{D}_c^p)$  的二元辅助函数. 固定除  $\mathbf{D}_c^p$  外的  $\{\mathbf{D}^k \geq \mathbf{0}, k=1, 2, \dots, N\}, \mathbf{L} \geq \mathbf{0}, \mathbf{R} \geq \mathbf{0}$  和  $\mathbf{Z}_c^p \geq \mathbf{0}$ ,  $Q_{D^p}(\mathbf{D}_c^p, \mathbf{Z}_c^p)$  是  $\mathbf{D}_c^p$  的严格

凸函数,所以在  $Q_{D^p}(\mathbf{D}_c^p, \mathbf{Z}_c^p)$  的唯一最小值处有

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial Q_{D^p}(\mathbf{D}_c^p, \mathbf{Z}_c^p)}{\partial \mathbf{D}_c^p} &= 2\mathbf{K}_{D^p}(\mathbf{Z}_c^p) (\mathbf{D}_c^p - \mathbf{Z}_c^p) + \\
 2[\mathbf{E}_c(\mathbf{Z}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p}) - \mathbf{V}_c^p] &= 0 \tag{A25}
 \end{aligned}$$

那么,最小值点为

$$\mathbf{D}_c^p = \mathbf{Z}_c^p + [\mathbf{K}_{D^p}(\mathbf{Z}_c^p)]^{-1} [\mathbf{V}_c^p - \mathbf{E}_c(\mathbf{Z}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p})] \tag{A26}$$

根据引理 1,

$$F_{D^p}(\mathbf{Z}_c^p) < F_{D^p}(\mathbf{D}_c^p) \tag{A27}$$

当仅考虑  $D_{ic}^p$ , 由式(A26)有

$$D_{ic}^p = -\varepsilon_1 + \frac{V_{ic}^p Z_{ic}^p}{[\mathbf{E}_c(\mathbf{Z}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p})]_i} \tag{A28}$$

取  $\varepsilon_1 \rightarrow 0$ , 则

$$D_{ic}^p = \frac{V_{ic}^p Z_{ic}^p}{[\mathbf{E}_c(\mathbf{Z}_c^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p})]_i} \tag{A29}$$

令  $\mathbf{Z}_c^p = \mathbf{D}_c^p$  (present) 和  $\mathbf{D}_c^p = \mathbf{D}_c^p$  (new) 分别为  $\mathbf{D}_c^p$  的当前值和更新后的值,用向量形式表示式(A29),并根据式(27)有,在固定除  $\mathbf{D}_c^p$  外的  $\{\mathbf{D}^k \geq \mathbf{0}, k=1, 2, \dots, N\}, \mathbf{L} \geq \mathbf{0}$  和  $\mathbf{R} \geq \mathbf{0}$  的情况下,按

$$\mathbf{D}_c^p \text{ (new)} = \mathbf{V}_c^p \otimes \mathbf{D}_c^p \text{ (present)} \odot [\mathbf{S} T_{cc} (\mathbf{D}_c^p \text{ (present)} + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_c^p})] \tag{A30}$$

调整  $\mathbf{D}_c^p$ , 可使目标函数值下降. 如果  $\forall i \in \{1, 2, \dots, l_1\}$ ,  $V_{ic}^p \geq 0$ , 且令  $\mathbf{D}_c^p$  (present) 是非负的, 执行式(A30)后  $\mathbf{D}_c^p$  (new) 是非负的; 如果  $\forall i \in \{1, 2, \dots, l_1\}$ ,  $V_{ic}^p \geq 0$  不能被满足, 执行式(A30)后  $\mathbf{D}_c^p$  (new) 未必非负, 这样不能满足 BFBNMSF 对分解结果非负的要求, 所以这时不能用式(A30)调整  $\mathbf{D}_c^p$ .

#### 4. 对定理 4 的证明

因为

$$\begin{aligned}
 F_{D^p}(\mathbf{D}_{qc}^p) &= (\mathbf{D}_{qc}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{qc}^p})^T \mathbf{S} T_{cc} (\mathbf{D}_{qc}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{qc}^p}) - 2(\mathbf{D}_{qc}^p + \boldsymbol{\varepsilon}_{D_{qc}^p})^T \mathbf{V}_{qc}^p \\
 &= \sum_{i=1}^{l_1} \sum_{j=1}^{l_1} (D_{ic}^p + \varepsilon) [\mathbf{E}_c]_{ij} (D_{jc}^p + \varepsilon) - 2 \sum_{h=1}^{l_1} (D_{hc}^p + \varepsilon) V_{hc}^p \tag{A31}
 \end{aligned}$$

所以  $D_{qc}^p$  的目标函数为

$$\begin{aligned}
 F_{D^p}(D_{qc}^p) &= [\mathbf{E}_c]_{qq} (D_{qc}^p + \varepsilon)^2 + 2(D_{qc}^p + \varepsilon) \cdot \\
 & \left\{ \sum_{j=1, j \neq q}^{l_1} [\mathbf{E}_c]_{qj} (D_{jc}^p + \varepsilon) - V_{qc}^p \right\} \tag{A32}
 \end{aligned}$$

$F_{D^p}(D_{qc}^p)$  是抛物线函数, 在除  $D_{qc}^p$  外的  $\{D^k \geq 0, k=1, 2, \dots, N\}$ ,  $L \geq 0$  和  $R \geq 0$  固定的情况下,  $[E_c]_{qq} > 0$ , 令  $D_{qc}^p(\text{new})$  代表  $D_{qc}^p$  被更新后的值, 根据抛物线理论, 为使  $F_{D^p}(D_{qc}^p)$  达到对  $D_{qc}^p$  有非负限制时的最小值应这样操作: 如果  $F_{D^p}(D_{qc}^p)$  的最小值点处  $D_{qc}^p$  为非负值, 取  $D_{qc}^p(\text{new})$  为此最小值点处的  $D_{qc}^p$  值; 如果  $F_{D^p}(D_{qc}^p)$  的最小值点处  $D_{qc}^p$  为负值, 取  $D_{qc}^p(\text{new})$  为 0. 按照这样的思路, 此时  $F_{D^p}(D_{qc}^p)$  在

$$D_{qc}^p(\text{new}) = \max \left\{ -\varepsilon + \frac{V_{qc}^p - \sum_{j=1, j \neq q}^{l_1} [E_c]_{qj} (D_{jc}^p + \varepsilon)}{ST_{cc}}, 0 \right\} \quad (\text{A33})$$

处达到对  $D_{qc}^p$  有非负限制时的最小值 (如果  $x \geq 0$ ,  $\max\{x, 0\}$  不改变  $x$ ; 如果  $x < 0$ ,  $\max\{x, 0\}$  使  $x$  取零).



**LI Le**, Ph. D., lecturer. His research interests are mainly in non-negative matrix factorization, non-negative matrix set factorization and their application on image engineering.

**ZHANG Yu-Jin**, professor, Ph. D. supervisor. His research interests are in image engineering and related subjects. <http://www.ee.tsinghua.edu.cn/~zhangyujin/index.htm>

## Background

Non-negative matrix factorization (NMF) is a relatively new but more and more popular method for representations of nonnegative multivariate data. NMF can reveal the latent structure, feature or pattern in the data, so that it has been applied in several research fields. However, NMF is confronted with two main problems (unsatisfactory accuracy of representation and bad generality) while the processed is a matrix set, because the object processed by NMF is intrinsically a set of vectors, and because the necessary vectorization for every matrix in the processed matrix set often make the dimension of the parameter in NMF learning to be much greater than training sample size so that the learning becomes typical small-sample learning.

In this paper supported by Project 60872084 of National

Natural Science Foundation of China, non-negative matrix set factorization (NMSF) is conceived to overcome the problems above and to retain NMF's good properties. As opposed to NMF, NMSF directly processes original data matrices rather than vectorization results of them. Under the frame of NMSF, bilinear form-based non-negative matrix set factorization (BFBNMSF) is systematically studied, and a monotonic algorithm of BFBNMSF is put forward. Theoretical analysis and experimental results show that while processing a data matrix set, BFBNMSF results in more accurate representation and holds better generality than NMF, therefore it tends to extract more essential features of data matrix sets than NMF.